



## 多壁碳纳米管与金属表面间接接触行为的分子动力学模拟

杨权 马立 耿松超 林旂旒 陈涛 孙立宁

## Molecular dynamics simulation of contact behaviors between multiwall carbon nanotube and metal surface

Yang Quan Ma Li Geng Song-Chao Lin Yi-Ni Chen Tao Sun Li-Ning

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 106101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20202194

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202194>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

界面接枝羟基对碳纳米管运动和摩擦行为影响的分子动力学模拟

Influence of hydroxyls at interfaces on motion and friction of carbon nanotube by molecular dynamics simulation

物理学报. 2017, 66(4): 046101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.046101>

一种新型的三壁碳纳米管螺旋振荡器:分子动力学模拟

A novel triple-walled carbon nanotube screwing oscillator: a molecular dynamics simulation

物理学报. 2020, 69(22): 228801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200821>

界面羟基对碳纳米管摩擦行为和能量耗散的影响

Influences of hydroxyl groups on friction behavior and energy dissipation of carbon nanotube

物理学报. 2018, 67(7): 076101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180311>

石墨烯碳纳米管复合结构渗透特性的分子动力学研究

Molecular dynamics study on permeability of water in graphene-carbon nanotube hybrid structure

物理学报. 2018, 67(5): 056102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172424>

含缺陷碳纳米管及碳纳米豆荚静动力特性模拟研究

Simulation of static and dynamic mechanical characteristics of carbon nanotubes and carbon nano-peapods with defects

物理学报. 2019, 68(16): 166101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190594>

基于扫描电子显微镜的碳纳米管拾取操作方法研究

Method of picking up carbon nanotubes inside scanning electron microscope

物理学报. 2018, 67(13): 136801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180347>

# 多壁碳纳米管与金属表面间接接触行为的分子动力学模拟\*

杨权<sup>1)</sup> 马立<sup>1)†</sup> 耿松超<sup>1)</sup> 林旖旎<sup>1)</sup> 陈涛<sup>2)‡</sup> 孙立宁<sup>2)</sup>

1) (上海大学机电工程与自动化学院, 上海 200072)

2) (苏州大学机器人与微系统研究中心, 苏州 215021)

(2020 年 12 月 23 日收到; 2021 年 3 月 10 日收到修改稿)

碳纳米管与金属表面间的界面接触行为对碳基电子器件的性能研究具有重要意义. 本文利用分子动力学模拟方法研究了端部开口和闭口的多壁碳纳米管与金属表面间的界面接触构型和粘着强度. 模拟结果表明, 多壁碳纳米管在金属表面上的位置和形状变化是因为减少的范德瓦耳斯能转变成碳纳米管的内能; 多壁碳纳米管与金属表面的结合能为负值, 表明两者存在粘着作用; 多壁碳纳米管水平地接触金属表面时的粘着强度受初始间距、接触长度和金属种类影响, 即范德瓦耳斯能作用的初始间距阈值约为 1 nm 且最终平衡状态时的两者间距约为 0.3 nm; 随着两者接触长度增加, 粘着强度增大, 铂与碳纳米管的粘着强度比钨和铝的大; 端部开口和闭口的碳纳米管与金属表面垂直接触时的粘着强度都比水平接触时的小, 两端开口的碳纳米管在金属表面上发生径向压缩变形, 最终形成带状结构; 而两端封闭的碳纳米管在金属表面上发生轴向压缩变形; 在碳纳米管场效应晶体管中, 两端开口的多壁碳纳米管与单壁碳纳米管一样变形成带状结构, 并且各个管壁之间以及最外层管壁与金属电极之间的间距相当, 该原子尺度的间距 (约 0.34 nm) 保证电子从金属隧穿到最外层管壁, 并在内层管壁之间径向迁移.

**关键词:** 碳纳米管, 范德瓦耳斯能, 分子动力学

**PACS:** 61.48.De, 34.20.-b, 02.70.Ns

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202194

## 1 引言

碳纳米管 (carbon nanotubes, CNTs) 具有独特的电性和力学特性<sup>[1-4]</sup>, 可用于制造纳米电子器件, 在微系统技术和纳米技术方面有着广阔的应用前景. 近年来碳纳米管已被用于制造碳纳米管场效应晶体管 (carbon nanotube field effect transistors, CNTFETs), 以取代传统的硅沟道材料使摩尔定律延续<sup>[5-7]</sup>. 在基于扫描电子显微镜 (scanning electron microscope, SEM) 的微纳操作机器人系统组装碳纳米管场效应管的过程中, 碳纳米管的拾

取、转移和放置等三维操作主要依据碳纳米管与金属表面之间的范德瓦耳斯粘着作用<sup>[8-10]</sup>. 在这种情况下, 碳纳米管与金属表面间的范德瓦耳斯力可以通过原子显微镜 (atomic force microscope, AFM) 悬臂梁的形变量测得<sup>[11,12]</sup>, 或者根据 Lennard-Jones 对势进行计算得到<sup>[9-11,13]</sup>. 但是, 碳纳米管在金属表面上这种微弱的不稳定的范德瓦耳斯粘着状态<sup>[14]</sup>和几何变形<sup>[15]</sup>不仅降低三维操作的精准性而且对组装之后的场效应管的电学特性有很大的影响. 因此, 研究碳纳米管与金属的界面接触行为对提高碳纳米管场效应管的电学性能至关重要<sup>[16]</sup>. 但是, 目前的实验研究缺乏有效的观察工具

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2018YFB1309200) 和国家自然科学基金 (批准号: 61573238) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [malian@shu.edu.cn](mailto:malian@shu.edu.cn)

‡ 通信作者. E-mail: [chent@suda.edu.cn](mailto:chent@suda.edu.cn)

来研究碳纳米管与金属表面原子尺度的接触行为<sup>[17–20]</sup>. 分子动力学作为一种重要的计算机模拟手段, 可以提供碳纳米管与金属表面接触行为原子尺度的详细信息<sup>[21–24]</sup>. 以半导体性的单壁碳纳米管作为沟道材料组装的场效应管具有优异的开关比, 运用分子动力学方法, 其在场效应晶体管中原子尺度的界面接触行为已经得到研究<sup>[16,25]</sup>. 而实验研究发现结构变形多壁碳纳米管在场效应晶体管中同样表现栅极效应<sup>[15]</sup>且不同电学性质多壁碳管的选择性制备及其器件搭建相对容易, 但是, 对多壁碳纳米管场效应晶体管中的界面接触行为的仿真研究较少. 另外, 在使用化学气相沉积法制备的多壁碳纳米管进行拾取操作及晶体管组装等实验研究中<sup>[10]</sup>, 多壁碳纳米管的两端为具有端帽的封闭结构<sup>[26,27]</sup>, 具有该结构的碳纳米管与金属表面水平接触时的界面接触行为与两端开口的大不相同<sup>[28–31]</sup>. 并且, 端部闭口和开口的多壁碳纳米管与金属表面以垂直模式接触<sup>[25,32]</sup>时的粘着强度以及该模式晶体管的电学性能, 与水平接触模式时的都存在很大差异<sup>[33,34]</sup>. 因此, 亟需分子动力学方法研究两端开口和封闭的多壁碳纳米管与金属间水平或者垂直接触时纳米尺度的界面接触行为.

本文通过分子动力学模拟方法, 研究了碳纳米管场效应晶体管组装过程中碳纳米管与金属表面原子尺度的界面接触行为, 包括, 以范德瓦耳斯能差值和结合能来表征两端封闭和开口的多壁碳纳米管分别以垂直和水平模式接触金属表面时的粘着强度, 而多壁碳纳米管的界面接触构型主要表现为其在金属表面上的位置和形状变化; 同时研究了组装之后的碳纳米管场效应管中两端封闭和开口的多壁碳纳米管以水平模式接触金属源漏电极表面时的界面接触行为.

## 2 计算方法

分子动力学计算的关键在于力场的选取, 利用 COMPASS (Condensed-phase Optimization Molecular Potentials for Atomistic Simulation Studies) 力场进行了多壁碳纳米管与金属表面之间的模拟. COMPASS 力场是一种 *ab initio* 力场, 参数来自于 *ab initio* 计算, 能够在统计意义上保持原子模拟系统和真实系统一致. 在 COMPASS 力场中, 分子系统的总能量由势能和动能组成. 其中, 势能包括价键能、交叉项价键能和非键能.

价键能和交叉项价键能统称为内能. 非键能包括范德瓦耳斯能、静电能和氢键能. 范德瓦耳斯能采用经典 Lennard-Jones 对势表示. 在确定力场之后, 选择在正则系综  $NVT$  ( $N$  为原子数,  $V$  为体积,  $T$  为温度) 下进行了分子动力学模拟. 采用 Andersen 方法进行系综等温调节, 温度控制在 300 K. 为了获得较高的计算精度, 截止距离选择 15.5 Å. 为了使原子能尽快达到平衡, 动力学方程的数值积分选择 Velocity Verlet 算法. 为了获得稳定、精确的原子构型和足够的物理数据, 所有原子的坐标和速度都存储起来, 总模拟时间设置为 100 ps, 计算步长为 1 fs, 每 1000 步输出一次. 为了模拟多壁碳纳米管组装过程中的界面接触构型和粘着强度, 选取了直径为 13.56 Å、管壁间距为 3.347 Å、长度为 54.11 Å 的三壁碳纳米管 (10, 10). 两端封闭的三壁碳纳米管分别为 (6, 6), (10, 10), (28, 0); 长度为 54.11 Å. 以金、铂、铝、钨、钽的厚度为 15 Å 的 (1, 0, 0) 晶格平面构建一个尺寸为 57.68 Å × 57.68 Å × 75.77 Å 的超胞. 在对碳纳米管场效应晶体管的模拟中, 沟道材料为直径 16.27 Å、长度 137.73 Å 的三壁碳纳米管 (12, 12). 单壁半导体性质碳纳米管 (20, 0) 的直径为 15.66 Å, 长度为 140.58 Å.

## 3 结果与讨论

### 3.1 多壁碳纳米管与金属接触特性

基于 SEM 的微操作机器人系统能够进行多壁碳纳米管的拾取、转移和放置等三维操作以及器件组装. 首先使用右侧水平安装的表面镀金的 AFM 悬臂梁把碳纳米管从基底上拾取下来, 使其与左侧垂直安装的 AFM 悬臂梁建立水平接触模式, 如图 1(a) 所示. 然后向下移动右侧 AFM 悬臂梁, 由于碳纳米管与 AFM 悬臂梁之间的范德瓦耳斯粘着接触作用, 左侧 AFM 悬臂梁会移动相同的距离.

#### 3.1.1 多壁碳纳米管在金属表面上的粘着强度

多壁碳纳米管与表面镀金的 AFM 悬臂梁以水平模式接触时的分子动力学模型如图 1(b) 所示. 对于端部开口的碳纳米管, 不考虑氢原子的情况下, 只存在不饱和的碳原子, 这样在运行过程中不存在静电能和氢键能, 非键能仅由范德瓦耳斯能组成, 即便存在带有氢原子的饱和碳原子结构, 静电

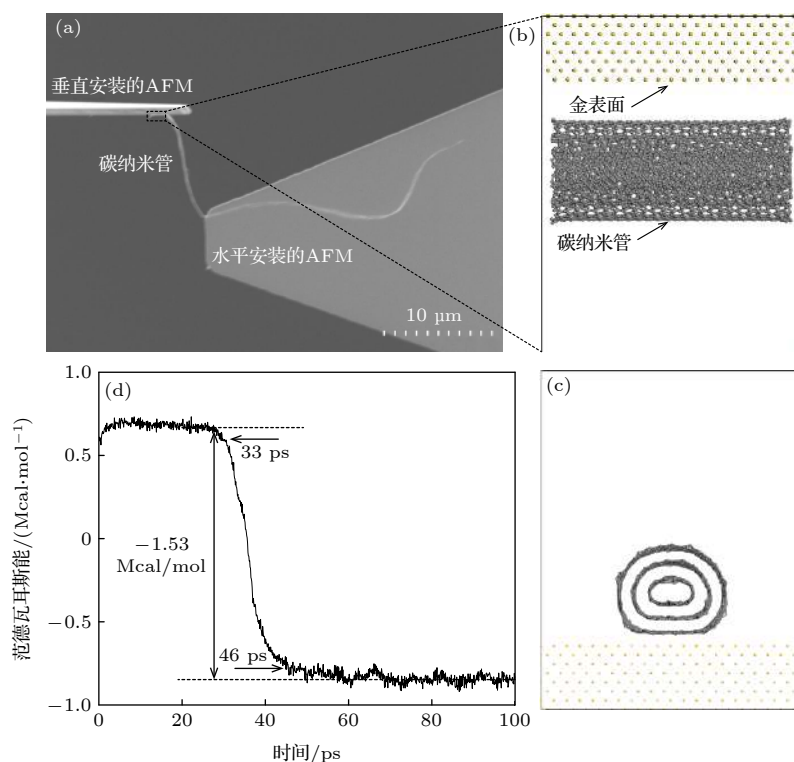


图1 多壁碳管及其分子动力学模型 (a) 碳纳米管和AFM悬臂梁的SEM图像; (b) 原子模型侧视图; (c) 主视图; (d) 范德瓦耳斯能差值

Fig. 1. Picked CNT and its molecular dynamic model; (a) SEM images of CNT and AFM cantilever; (b) side view; (c) front view; (d) vdW energy reduction.

能相对范德瓦耳斯能较小, 碳纳米管与金表面的界面接触行为也主要是由于范德瓦耳斯能的作用, 这样建立的分子动力学模型与实验吻合. 图1(c)所示的是在碳纳米管与金表面接触的最终稳定状态时, 碳纳米管逐渐接近金表面并且形成带状结构. 如图1(d)所示, 在前33 ps 范德瓦耳斯能保持在高能态, 然后急剧下降, 在46 ps 以后保持在低能的稳定状态, 能量差大约为1.53 Mcal/mol. 该范德瓦耳斯能下降趋势与单壁碳纳米管在铂、铝和银纳米线的圆柱面上发生径向压缩变形时的下降趋势一致, 尽管文献[23, 33]中碳纳米管的直径、金属种类和几何结构等条件不同, 导致初始和最终状态的范德瓦耳斯能数值不同, 但是范德瓦耳斯能下降数值与本文模拟结果在一个数量级, 较为一致.

由于范德瓦耳斯能量的影响, 在8 ps 时总能、势能、内能和动能同时出现急剧增加. 图2所示的是碳纳米管与金表面组成的界面体系的总能、势能、内能和动能的变化情况. 如图2(a)和图2(b)所示, 在33 ps 后总能和势能分别从约144.3 Mcal/mol 和约140 Mcal/mol 的高能态急剧下降到约143 Mcal/mol 和约138.7 Mcal/mol 的稳定低能状态,

然后在46 ps 以后保持稳定. 如图2(c)所示, 内能从约139.3 Mcal/mol 逐渐增加到约139.5 Mcal/mol. 但是, 如图2(d)所示, 动能几乎保持恒定, 大小约为4.5 Mcal/mol, 原因在于系统温度维持在300 K, 对界面接触形态几乎没有影响. 总能和势能的减少是由于范德瓦耳斯能的降低, 文献[23, 24, 33]中提到范德瓦耳斯能一部分转换成内能, 另一部分转换成动能, 但是没有给出动能的具体数值. 实际上并非范德瓦耳斯能的绝对值发生转化, 而是范德瓦耳斯能差值(-1.53 Mcal/mol)一部分转换成碳纳米管的内能(内能增值0.2 Mcal/mol), 即, 势能差值 = 内能差值 + 范德瓦耳斯能差值, 如表1所列, 所以范德瓦耳斯能差值除了转化成内能增量外, 能量降低主要是为了满足系统势能最低的稳定状态. 另一部分极小的能量差值(约0.03 Mcal/mol)主要体现在动能极小的误差值上.

除范德瓦耳斯能差值外, 多壁碳纳米管与金表面的接触强度也可用结合能来表征. 结合能定义为  $E_{\text{Binding}} = E_{\text{Total}} - E_{\text{CNT}} - E_{\text{Au}}$ . 其中,  $E_{\text{Total}}$  为碳纳米管与金表面体系的总能量,  $E_{\text{Binding}}$  为碳纳米管与金原子的结合能,  $E_{\text{Au}}$  为没有碳纳米管的金



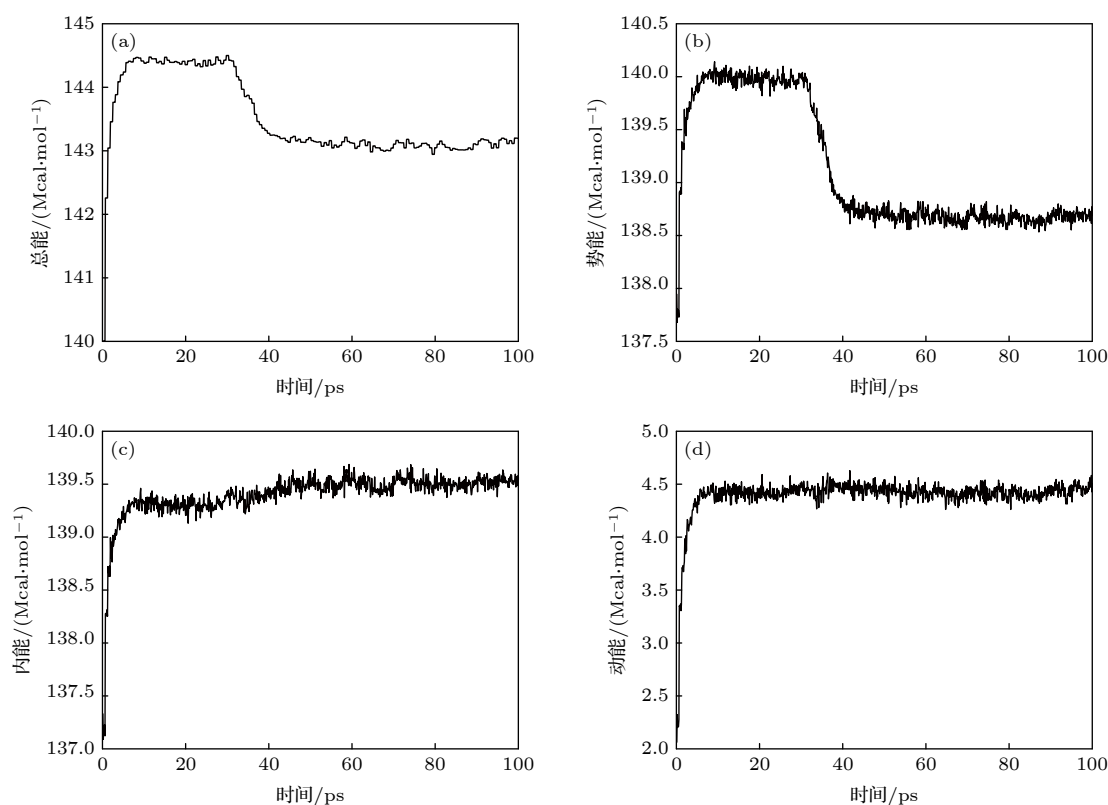


图2 碳纳米管与金界面的能量变化 (a) 总能; (b) 势能; (c) 内能; (d) 动能

Fig. 2. Energy changing at the interface of CNT and gold surface: (a) Total energy; (b) potential energy; (c) internal energy; (d) kinetic energy.

表1 多壁碳纳米管与金表面接触系统径向压缩变形前后的能量组成

Table 1. The energy components of multi-walled CNT and gold surface before and after collapse.

能量组成	初始状态	稳定状态	能量差值
总能/Mcal/mol	144.3	约143	-1.3
势能/Mcal/mol	约140	约138.7	-1.3
动能/Mcal/mol	$4.5 \pm 0.03$	$4.5 \pm 0.03$	—
内能/Mcal/mol	约139.3	约139.5	0.2
范德瓦耳斯能/Mcal/mol	约0.7	约-0.83	-1.53

表面能量,  $E_{\text{CNT}}$  为没有金表面的碳纳米管能量. 通过分子动力学计算, 得到碳纳米管与金界面间的结合能约为  $-1798.45 \text{ kcal/mol}$ , 负值表示碳纳米管与金表面存在吸附作用.

碳纳米管与金表面除了以水平模式接触外, 也可以垂直接触, 图3所示的是端部封闭的多壁碳纳米管与金表面分别以水平和垂直模式接触的示意图. 除了接触模式和碳纳米管端部结构外, 接触间距、接触长度和金属种类也会对碳纳米管与金属表面的粘着强度产生影响, 下面分别讨论上述因素对粘着强度的影响.

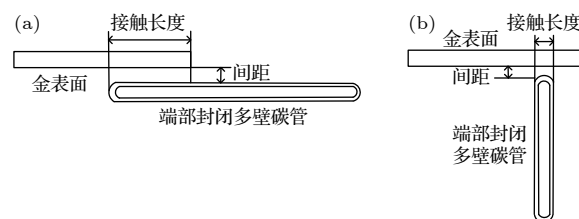


图3 碳纳米管与金属表面的接触模式 (a) 水平接触; (b) 垂直接触

Fig. 3. Contact model between CNT and metal surface: (a) Horizontal contact; (b) vertical contact.

两端开口的多壁碳纳米管与金属表面以水平模式接触时的范德瓦耳斯粘着接触强度在很大程度上受两者接触距离的影响, 一般很难使用实验方法确定纳米尺度的接触间距, 而分子动力学方法能够表征初始接触间距对端部开口的碳纳米管与金表面间粘着强度的影响. 当接触距离大于某个阈值时, 超出范德瓦耳斯能量作用范围, 多壁碳纳米管很难在金属表面发生径向压缩变形 (图4(a)和图4(d)), 此时范德瓦耳斯能没有出现明显的由高能状态到低能状态的下降, 能量维持在约  $0.7 \text{ Mcal/mol}$  较高数值的稳定状态 (图4(g)). 当接触距离小于该阈

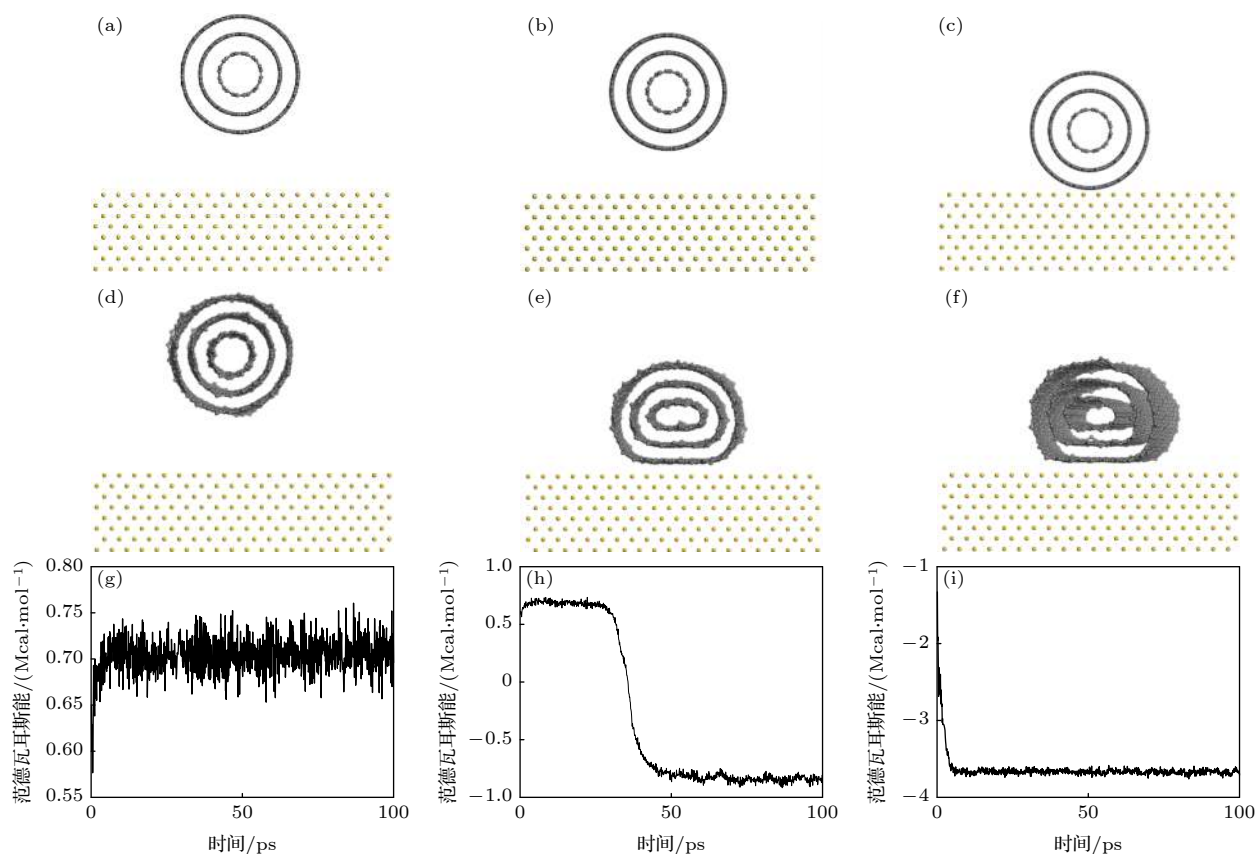


图4 碳纳米管与金表面在不同初始间距下的界面接触构型及范德瓦耳斯能差 初始间距: (a) 1.1999 nm; (b) 0.9489 nm; (c) 0.1378 nm; 平衡间距: (d) 1.16 nm; (e) 0.3081 nm; (f) 0.2933 nm; 范德瓦耳斯能差: (g) 1.1999 nm; (b) 0.9489 nm; (c) 0.1378 nm

Fig. 4. Contact configuration and Van der Waals energy of CNT with different initial gap: (a) Initial separate gap of 1.1999 nm; (b) 0.9489 nm; (c) 0.1378 nm; (d) final gap of 1.16 nm; (e) 0.3081 nm; (f) 0.2933 nm; Van der Waals energy at distance of (g) 1.1999 nm; (b) 0.9489 nm; (c) 0.1378 nm.

值时 (图 4(b) 和图 4(e)), 多壁碳纳米管逐渐靠近金表面并发生明显径向压缩变形, 范德瓦耳斯能快速下降至低能稳定状态 (图 4(h)). 所以, 如表 2 所列, 具有范德瓦耳斯作用的初始接触距离的阈值约 1 nm, 原因在于范德瓦耳斯相互作用为长程的弱相互作用, 即超过初始接触间距的阈值时, 进一步增大多壁碳纳米管在金表面上初始接触距离, 能够减弱了两者的粘着强度; 相反地, 当进一步减小接触距离至小于管壁间距 (0.34 nm) 的 0.1378 nm 时 (图 4(c)), 范德瓦耳斯能快速下降并保持低能的稳定状态 (图 4(i)). 碳纳米管发生径向压缩变形出现带状结构并因为碳原子的热动力学特性出现轻微旋转 (图 4(f)), 最终稳定状态的平衡接触距离约为 0.2933 nm, 最终的平衡接触距离甚至比最初的接触距离还要大, 这是因为范德瓦耳斯能量要保持吸引部分和排斥部分之间的平衡状态.

多壁碳纳米管与金属表面的初始接触间距为 0.9489 nm 时的径向压缩变形行为, 其平衡时的接

表 2 多壁碳纳米管与金表面上径向压缩变形前后的初始间距及其对应能量

Table 2. VDW energy of multi-walled CNT and gold surface at different original distance.

能量对应间距	初始状态	最终状态	范德瓦耳斯能差
能量/ (Mcal/mol)	约0.7(1.1999)	约0.7(1.16)	0
(间距/ nm)	约0.7(0.9489)	-0.8(0.3081)	1.5
	-3.6(0.1378)	-3.6(0.2933)	0

触距离大约为 0.3081 nm. 这些结果表明: 达到最终的平衡状态时, 径向压缩的碳纳米管与金表面间的界面接触间距大约在 0.3 nm, 该距离与碳纳米管各层管壁之间的间距相当, 该原子尺度的平衡接触距离影响多壁碳纳米管的电子特性. 在多壁碳纳米管与金属表面之间范德瓦耳斯能的理论计算中, 一些文献 [35, 36] 把范德瓦耳斯能计算公式中的接触间距设定为石墨层间距 0.5, 0.43, 0.3 或者 0.34 nm, 而使用分子动力学计算得到多壁碳纳米

管与金表面的平衡接触距离的结果在 0.34 nm 数量级, 理论计算和模拟结果基本一致, 从而验证了范德瓦耳斯能吸引和排斥作用间距在该数量级上.

多壁碳纳米管与金属表面的范德瓦耳斯粘着强度还受到与金属材料性质相关的 Hamaker 常数的影响,  $H = \pi^2 B \rho^2$ , 其中  $\rho$  是单位体积的原子数 (每立方厘米的原子数),  $B$  是伦敦引力常数. 比如, 铂的原子浓度  $\rho$  为  $6.62 \times 10^{22}$ , 而钨和铝的原子浓度  $\rho$  分别为  $6.3 \times 10^{22}$  和  $6.02 \times 10^{22}$ , 因此碳纳米管与铂之间 Hamaker 常数较大, 据此计算得到的范德瓦耳斯粘着强度也较大. 而使用分子动力学模拟得到: 多壁碳纳米管在铂、铝和钨金属表面上具有相同初始分离间隙和晶格参数时范德瓦耳斯能的下降趋势相同, 金属铂的范德瓦耳斯能差值比金属铝和金属钨的都大, 如表 3 所列, 并且与钨和铝引起的结合能对比发现, 铂引起的结合能最高 (铂为  $-2452.75$  kcal/mol, 钨为  $-1451.45$  kcal/mol, 铝为  $-1314.33$  kcal/mol). 另外, 从碳纳米管的界面构型可以看出 (图 5(a)—(c)), 由于碳纳米管与铂的粘着强度较强, 吸附在铂表面的碳纳米管具有较宽的底层, 其顶层与表面平行, 显示出较大的径向压缩

变形程度. 文献 [37] 从电子尺度的密度泛函理论出发, 证明了在单壁碳纳米管与金属表面接触情况下, 铂原子与碳原子之间由于形成共价键而具有较强的结合能, 并且发生较大程度的径向压缩变形. 所以, 相对于钨针和表面镀铝的 AFM 悬臂梁而言, 表面镀铂 AFM 悬臂梁用作微操作系统的末端执行器来进行碳纳米管的拾取操作时具有更大的粘着力, 能够提高碳纳米管拾取成功率.

根据范德瓦耳斯能作用势的理论, 多壁碳纳米管与金属表面的范德瓦耳斯粘着强度是受到两者相互作用的单位体积原子个数影响的, 所以在金属材料种类确定以后, 两者粘着强度就受到有效碳原子个数的决定. 比如, 如图 6(a)—(c) 所示, 两端开口的多壁碳纳米管分别以 2.46, 3.689 和 4.919 nm 的长度水平地接触金表面时, 范德瓦耳斯能差值逐渐增大, 如表 3 所列. 如图 6(d)—(f) 所示, 即随着接触长度的增大, 范德瓦耳斯粘着强度增加, 并且开始下降和达到范德瓦耳斯能最低状态的时间都有提前, 以及最终稳定状态的范德瓦耳斯能最低数值跟着降低. 原因就在于较大的接触长度增加了碳纳米管与金表面作用的有效碳原子数. 因此, 在碳

表 3 多壁碳纳米管与金表面在不同金属种类、接触长度和接触模式下范德瓦耳斯能差  
Table 3. VDW energy of MWCNT and gold surface with different metal, contact length and model.

能量/(Mcal/mol)	金属种类			水平接触长度/nm			垂直接触		
	铂	铝	钨	2.46	3.689	4.919	两端开口	开口封闭	两端封闭
范德瓦耳斯能差	2	1.15	1.05	1.2	1.8	2.4	0	0.5	0

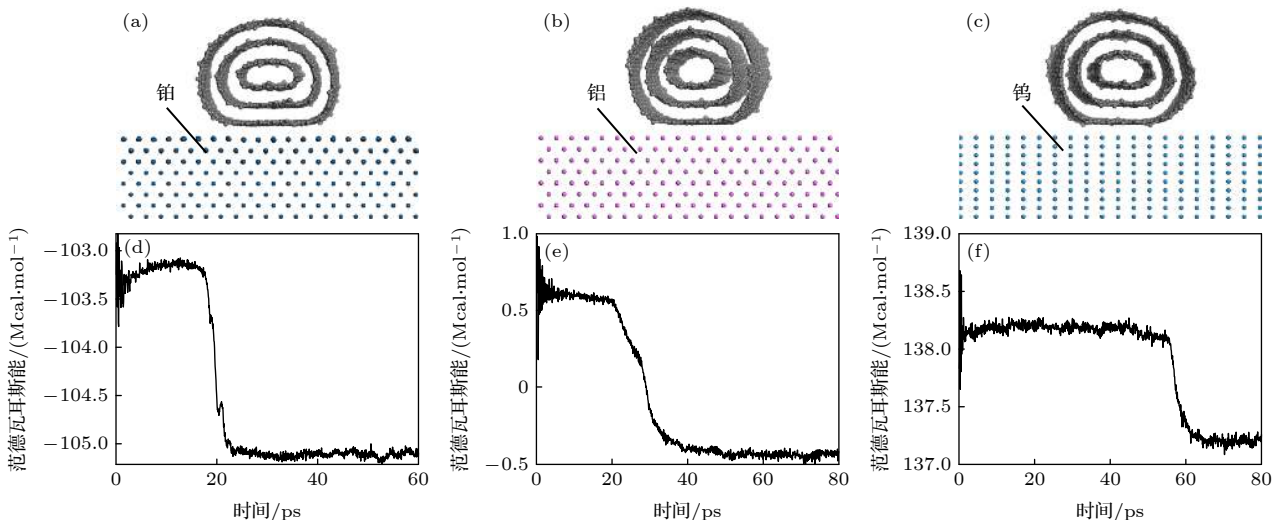


图 5 碳纳米管与不同金属间的界面接触构型和范德瓦耳斯能差值. 接触构型: (a) 铂; (c) 铝; (e) 钨; 范德瓦耳斯能差值: (d) 铂; (e) 铝; (f) 钨

Fig. 5. Contact behavior and VdW energy reduction of three-walled CNT on different metal: (a) Pt; (c) Al; (e) W; VdW energy reduction contacting with different metal: (d) Pt; (e) Al; (f) W.



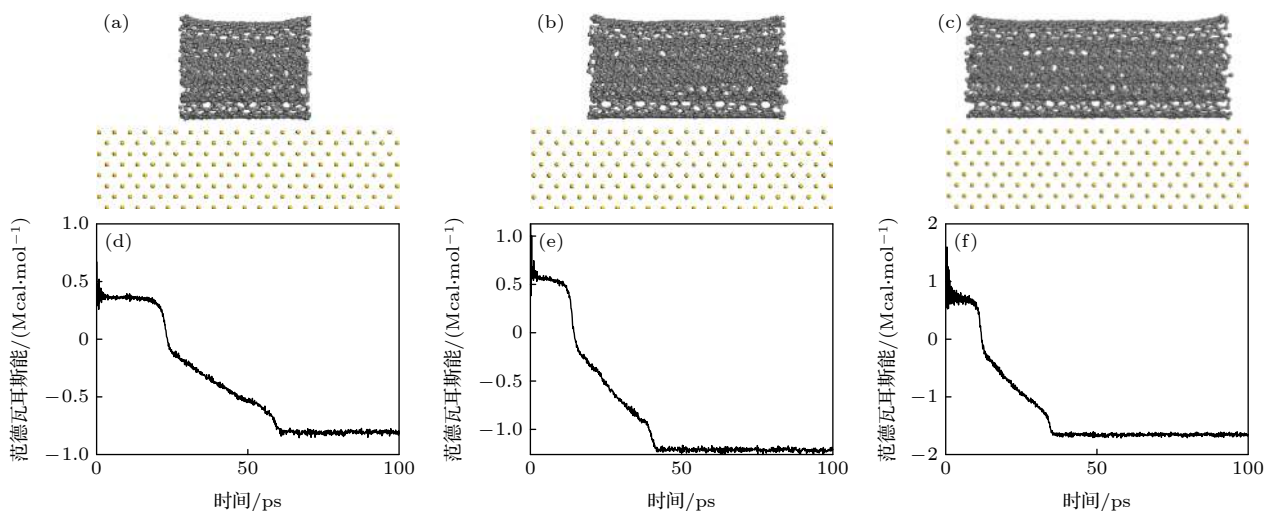


图6 碳纳米管与金在不同接触长度下的接触构型和范德瓦耳斯能差值. 接触构型: (a) 2.46 nm; (b) 3.689 nm; (c) 4.919 nm; 范德瓦耳斯能差值: (d) 2.46 nm; (e) 3.689 nm; (f) 4.919 nm

Fig. 6. Contact behavior and VdW energy reduction with different contact length. Contact behavior: (a) 2.46 nm; (b) 3.689 nm; (c) 4.919 nm; and VdW energy reduction under contact length: (d) 2.46 nm; (e) 3.689 nm; (f) 4.919 nm.

纳米管拾取过程中, 增加碳纳米管与 AFM 悬臂梁表面的接触长度, 也能够增加粘着强度.

另外, 多壁碳纳米管自身结构 (端部开口或端部闭口) 以及金属表面的接触模式 (水平接触和垂直接触) 也是通过改变有效碳原子数来影响两者范德瓦耳斯接触强度的. 比如, 多壁碳纳米管与金表面在垂直接触下的范德瓦耳斯能差值比水平接触下的小, 如图 7(d)–(f) 所示, 其中两端开口和两端封闭的碳纳米管与金属表面接触时范德瓦耳斯能差值几乎为零, 如表 3 所列, 原因在于碳纳米管与金表面实际接触的有效碳原子数少, 也可以理解为以极小的接触长度粘着在金表面. 两端开口的碳纳米管以垂直模式接近金表面, 但是没有发生形状变化 (图 7(a)). 同样以垂直模式接触时, 一端开口的碳纳米管发生径向压缩变形 (图 7(b)), 原因在于两端碳原子数量分布不对称, 内外层管壁之间的范德瓦耳斯作用导致其形变. 两端封闭的碳纳米管接近金表面时, 最外层管壁 (28, 0) 因轴向压缩变形而出现褶皱, 并与金表面发生倾斜 (图 7(c)), 碳纳米管轴向压缩是由于要维持三层管壁之间的间距一致, 而倾斜的原因在于锥形的端帽结构与金表面的作用距离不等, 且锥面上同时存在六元环和五元环, 导致有效碳原子密度分布不均匀.

### 3.1.2 多壁碳纳米管在金属表面上的界面构型

将径向压缩变形的碳纳米管与其初始形状进行比较, 进一步表征其几何形状和位置的变化过

程. 无量纲的碳纳米管浓度分布是指相对密度分布, 即在  $x, y, z$  方向上某一位置的碳原子与整个碳纳米管系统中碳原子的比例. 如图 8(a) 和图 8(b) 所示,  $x$  方向上浓度分布的三个对称峰值对应于碳纳米管的三层管壁. 径向压缩变形碳纳米管浓度分布曲线的中心部分相对于初始碳纳米管变宽变平, 且其浓度分布曲线右端沿  $x$  轴移动, 峰值减小. 此处, 定义变形率量化各层碳纳米管径向压缩变形程度, 变形率即径向压缩变形的碳纳米管的中间变平部分的宽度与初始碳纳米管直径的比值. 从内层到外层, 三层碳纳米管管壁的变形率依次为 0.588, 0.713 和 0.843, 即由于层间距离的影响径向压缩变形程度逐渐较小. 这是因为层间碳纳米管变为带状结构, 而外层的碳纳米管变为三角形. 如图 8(c) 和图 8(d) 所示, 初始碳纳米管与径向压缩变形碳纳米管之间沿  $y$  轴的浓度分布峰值宽度几乎相同, 说明在轴向上没有变形. 但是径向压缩碳纳米管的浓度分布曲线的位置发生移动, 这说明碳纳米管沿着  $y$  方向移动. 如图 8(e) 和图 8(f) 所示, 径向压缩碳纳米管在  $z$  方向的密度分布是不对称的, 并且左端的峰值比右端的峰值高. 另外, 径向压缩碳纳米管浓度分布的整体位置相对于初始碳纳米管向左移动, 这是由于碳纳米管吸附在金表面上. 整个碳纳米管在  $z$  方向的构型变化较小, 主要表现在与金表面的位置变化.

两端封闭的多壁碳纳米管在金表面上的内层管壁构型变化不容易直接地观测. 使用碳纳米管浓



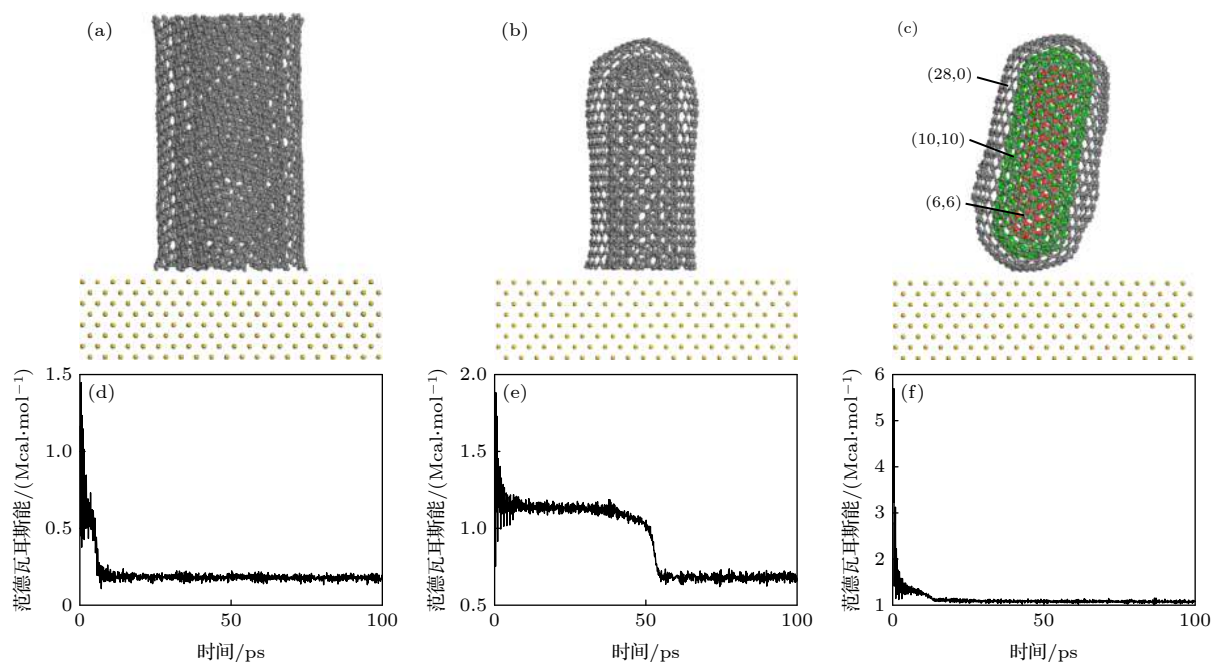


图 7 碳纳米管与金表面垂直接触下的接触构型和范德瓦耳斯能差值 接触构型: (a) 两端开口; (b) 一端开口和闭口; (c) 两端闭口; 范德瓦耳斯能差值: (d) 两端开口; (e) 一端开口和闭口; (f) 两端闭口

Fig. 7. Contact behavior in vertical contact and VdW energy reduction: (a) 2 open ends; (b) capped and open end; (c) 2 capped ends; VdW energy reduction with: (d) 2 open ends; (e) capped and open end; (f) 2 capped ends.

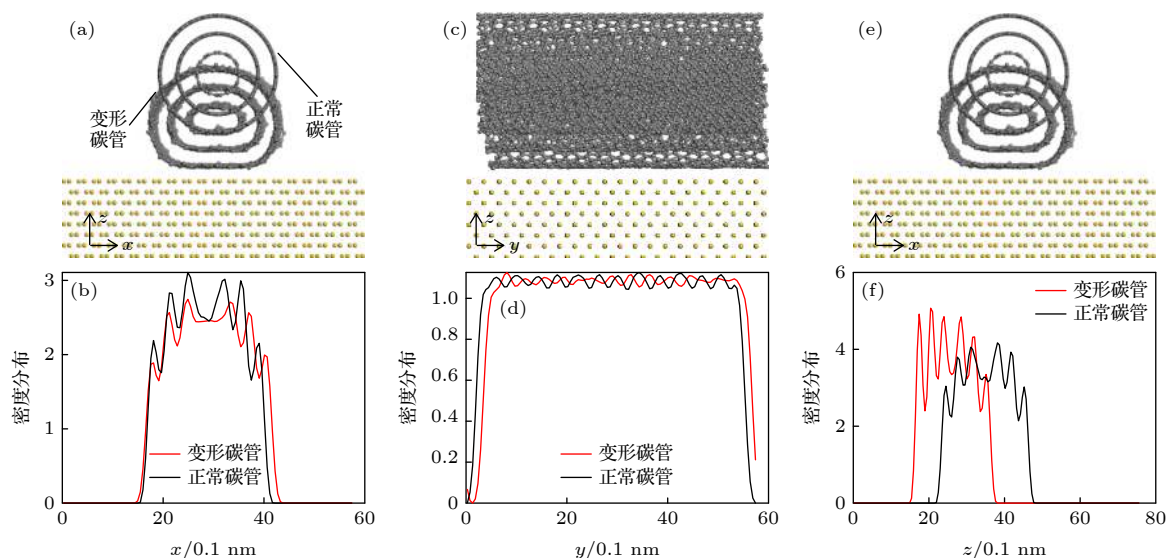


图 8 初始和变形的端部开口的三壁碳纳米管的浓度分布 (a)  $xz$  平面上; (b)  $x$  方向; (c)  $yz$  平面上; (d)  $y$  方向; (e)  $xz$  平面上; (f)  $z$  方向

Fig. 8. Concentration profile of initial and collapsed capped-ends three-walled CNT: (a)  $xz$  plane; (b)  $x$ ; (c)  $yz$  plane; (d)  $y$ ; (e)  $xz$  plane; (f)  $z$ .

度分布曲线能够表征内部两层碳纳米管的构型和位置变化. 为了直观起见, 分别以红色, 绿色和灰色来标记碳纳米管的三层管壁 (6, 6), (10, 10), (28, 0). 图 9 所示的是两端封闭的初始和径向压缩变形碳纳米管的相对密度分布曲线. 与两端开口的三壁碳纳米管相比, 两端封闭的碳纳米管的相对密

度曲线在  $x$ ,  $y$ ,  $z$  方向上都没有呈现较好的对称性且波动较大, 主要因为三层管壁之间的间距不等, 并且端部管壁呈锥形. 如图 9(a) 和图 9(b) 所示, 碳纳米管的相对浓度曲线的中间部分波动变小, 最外层管壁的变形率为 0.932, 中间层和最内层管壁的变形率分别为 0.98 和 0.964, 主要由最外层管壁

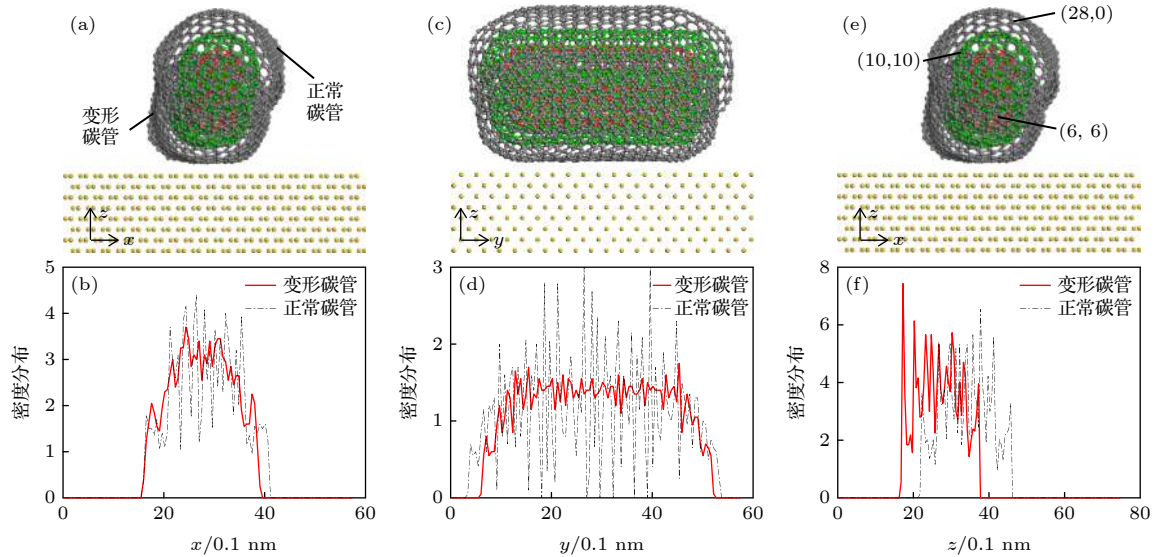


图9 初始和变形的端部闭口的三壁碳纳米管的浓度分布 (a)  $xz$  平面上; (b)  $x$  方向; (c)  $yz$  平面上; (d)  $y$  方向; (e)  $xz$  平面上; (f)  $z$  方向

Fig. 9. Concentration profile of initial and collapsed open-ends three-walled CNT: (a)  $xz$  plane; (b)  $x$ ; (c)  $yz$  plane; (d)  $y$ ; (e)  $xz$  plane; (f)  $z$ .

发生较大形变所导致, 并且三层管壁都有向左端运动的趋势. 从图 9(c) 和图 9(d) 可以看出, 径向压缩变形碳纳米管的相对浓度曲线两端部分向中间靠拢并且中间部分的波动变小, 因为三层管壁在  $y$  方向都发生了收缩. 从图 9(e) 和图 9(f) 可以看出, 变形碳纳米管的相对浓度曲线整体向左端移动, 并且最左端和最右端的宽度变小, 说明碳纳米管在  $z$  方向被压缩并且向靠近金表面的方向移动.

### 3.2 碳纳米管场效应晶体管中的界面接触行为

实验研究发现, 径向压缩变形的多壁碳纳米管在场效应晶体管中同样出现了栅极效应<sup>[15,38]</sup>. 碳纳米管可以以水平接触或者垂直接触模式构建场效应晶体管, 但是在垂直接触模式下, 开口或者闭口的碳纳米管在金属电极表面上的构型变化都不明显 (如图 7 所示). 而在以水平接触模式搭建的多壁碳纳米管场效应晶体管中, 碳纳米管会在金属电极表面发生径向压缩变形行为, 虽然只有最外层的管壁与金属电极直接接触, 但是变形多壁碳纳米管的几何构型, 如直径、层间距和机械弯曲等, 都会影响电子在界面间的迁移, 进而影响晶体管的电学性能. 原子尺度的分子动力学模拟可以从碳纳米管构型角度推测场效应晶体管的电学特性. 在借鉴现有碳纳米管晶体管的实验模型<sup>[7,39,40]</sup> 和模拟模

型<sup>[16,25]</sup> 的基础上, 选择以水平接触模式来构建多壁碳纳米管平面型晶体管的分子动力学模拟模型. 其中, 碳纳米管作为晶体管的沟道材料, 选用金属钼作为源极和漏极材料可以通过减小肖特基势垒而形成欧姆接触<sup>[40,41]</sup>, 而硅用作栅极衬底材料与二氧化硅在模拟研究中效果类似, 因为虽然二氧化硅与碳纳米管直接接触, 但是硅和二氧化硅同时表现为半导体性质的, 多壁碳纳米管在硅和二氧化硅表面上径向压缩变形程度相对金属而言较小, 保持具有一定刚性的圆柱形.

选择两端闭口和两端开口的三壁碳纳米管以及两端开口的单壁碳纳米管以水平接触模式来搭建场效应晶体管. 如表 4 所列, 三种结构的碳纳米管与源极和漏极的初始间隙大致相同 (约 0.6 nm), 与硅栅极的初始间隙也是基本一致 (约 0.9 nm), 硅表面略低于钼电极表面. 碳纳米管在源漏电极金属表面发生径向压缩变形时逐渐靠近电极表面, 端部与金属表面的间距分别为 0.29, 0.3204, 和 0.3 nm, 而中间部分的碳纳米管与硅电极表面的间距依次为 0.36, 0.3235 和 0.34 nm. 径向压缩变形的碳纳米管的最外层管壁与钼电极和硅栅极的接触间距大约为 0.29—0.36 nm, 该距离与多壁碳纳米管的管壁间距 (0.34 nm) 较为一致, 原子尺度的间距可以保证电子从金属电极隧穿进入碳纳米管最外层管壁, 进而在多壁碳纳米管的各个内层管壁

表 4 多壁碳纳米管最外层管壁与金表面的接触距离

Table 4. Contacting distance of outmost layer of MWCNT with gold surface.

碳纳米管结构	源漏初始间距/nm	源漏最终间距/nm	栅极初始间距/nm	栅极最终间距/nm
三壁两端闭口	0.6374	0.29	0.9233	0.36
三壁两端开口	0.6729	0.3204	0.932	0.3235
单壁两端开口	0.67	0.3	0.93	0.34

之间径向迁移, 不是单一地沿着轴向传导。

研究文献 [42–45] 表明径向压缩变形的单壁、双壁碳纳米管能够诱导其电学特性的转变, 比如通过改变其带隙使碳纳米管由金属性转变成半导体性, 从而使其具有栅极效应, 可以用来构建场效应晶体管。两端闭口和两端开口的三壁碳纳米管以及两端开口的单壁碳纳米管自身结构的变化却相差很大。两端闭口的三壁碳纳米管三层管壁从内向外分别为扶手型金属性碳纳米管 (6, 6), (10, 10) 和锯齿型半导体性碳纳米管 (28, 0), 各层碳纳米管之间距离不等, 最外层管壁与第二层管壁间距大约为 0.418 nm, 最内层管壁与第二层管壁的间距大约为 0.271 nm, 这种金属性和半导体性的碳纳米

管的不同手性的选择性组合最终综合起来决定多壁碳纳米管的电学特性。对比图 10(a) 和图 10(b), 发现端口封闭的碳纳米管几乎没有发生径向压缩变形行为, 三层管壁的变形率较小, 最外层管壁由于较大直径和层间距而出现轴向压缩变形。在图 10(c) 中, 两端闭口的三壁碳纳米管也没有形成带状结构, 保持管状结构, 并且管壁间距不等, 不利于电子在各层管壁之间迁移。所以, 径向压缩程度较小的两端封闭的三壁碳纳米管在原子尺度的研究上不是理想的晶体管沟道材料。

在两端开口的三壁碳纳米管与金属表面接触行为的研究中, 多壁碳纳米管是由同心管壁套装而成的三层同心圆柱结构, 每层管壁具有相同的手性指数, 且具有相同的管壁间距 0.34 nm。对比图 11(a) 和图 11(b), 由于碳纳米管径向压缩变形, 最外层纳米带状结构的直径比初始碳纳米管的小。在图 11(c) 中, 碳纳米管的三层管壁都形成纳米带状结构, 所有管壁间距依旧约为 0.34 nm, 多壁碳纳米管的三层管壁容易变形成六层较为平行的石墨烯结构。图 12(b) 所示径向压缩变形的单壁碳纳米管与图 12(a) 中初始碳纳米管的结构相比, 碳纳米管在钼电极的两端的变形为对称的, 图 12(c) 所示的带状碳纳米管相对初始碳纳米管直径变大

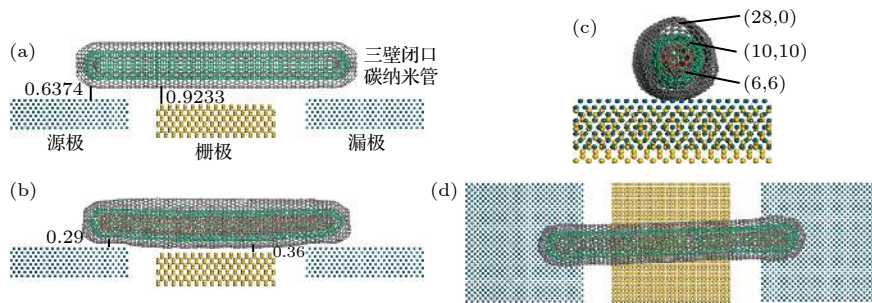


图 10 三壁闭口碳纳米管的场效应晶体管 (a) 原子模型; (b) 正视图; (c) 侧视图; (d) 俯视图

Fig. 10. Three-walled capped-ends CNTFET: (a) Molecular dynamic modeling of CNTFET; (b) front view; (c) side view; (d) top view.

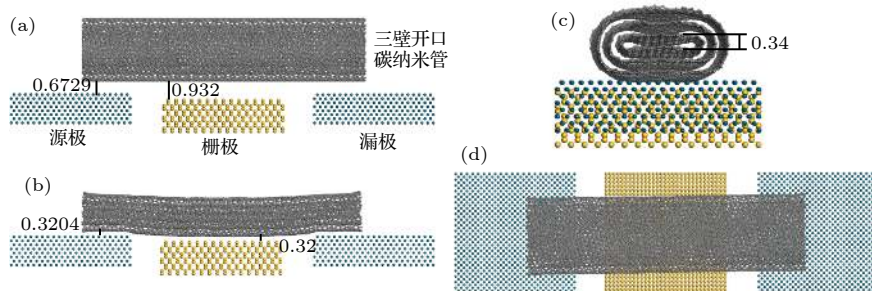


图 11 三壁开口碳纳米管场效应晶体管 (a) 原子模型; (b) 正视图; (c) 侧视图; (d) 俯视图

Fig. 11. Three-walled open-ends CNTFET: (a) Molecular dynamic modeling of CNTFET; (b) front view; (c) side view; (d) top view.



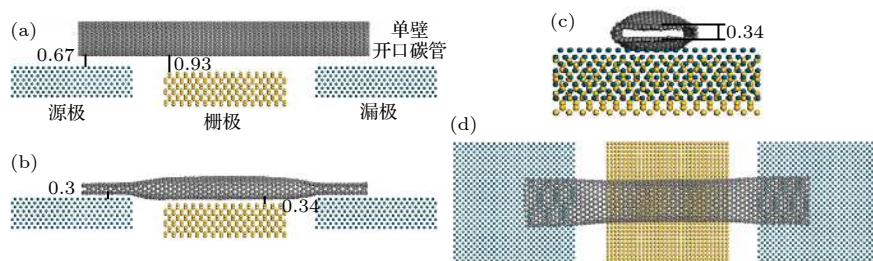


图 12 单壁两端开口碳纳米管场效应晶体管 (a) 原子模型; (b) 正视图; (c) 侧视图; (d) 俯视图

Fig. 12. Single-walled open-ends CNTFET: (a) Molecular dynamic modeling of CNTFET; (b) front view; (c) side view; (d) top view.

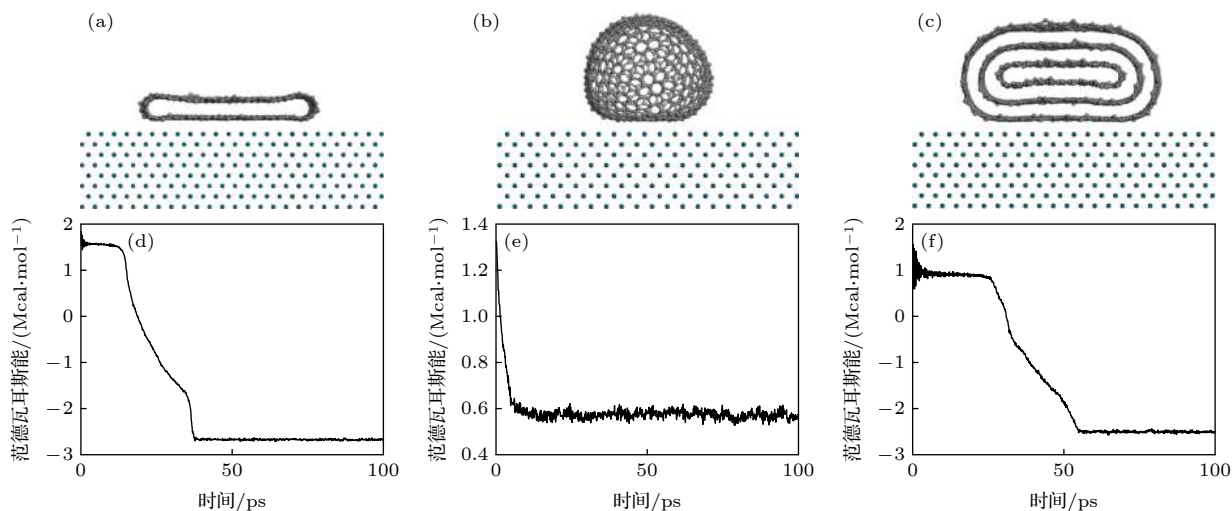


图 13 两端开口或闭口碳纳米管与钯电极接触的构型和范德瓦耳斯能差值 接触构型: (a) 单壁开口; (b) 单壁闭口; (c) 三壁开口; 范德瓦耳斯能差值: (d) 单壁开口; (e) 单壁闭口; (f) 三壁开口

Fig. 13. Interface configuration and Van der Waals energy of CNTs contacting with palladium: (a) Single-walled open-ends CNT; (b) single-walled closed-ends CNT; (c) three-walled open-ends CNT; Van der Waals energy of (d) single-walled open-ends CNT; (e) single-walled closed-ends CNT; (f) three-walled open-ends CNT.

(图 12(d)), 两层管壁间距约为 0.34 nm.

在两端开口的单壁碳纳米管场效应管中, 碳纳米管在钯电极上的径向压缩变形程度比在硅栅极上的大. 但在开口的三壁碳纳米管场效应管中, 碳纳米管在钯电极和硅栅极上的径向压缩变形程度几乎相同. 原因在于三壁碳纳米管的层间相互作用屏蔽了最外层管壁与钯电极之间的范德瓦耳斯作用. 但是, 通过比较两端开口的单壁和三壁碳纳米管的构型可知 (图 11(c) 和图 12(c)), 多壁碳纳米管径向压缩变形的带状结构中各个层的间距与单壁碳纳米管带状结构的间距几乎相等. 径向压缩变形多壁碳纳米管的内外管壁对电子迁移的影响与变形单壁碳纳米管的类似, 所以各层管壁性质和层间相互作用共同决定多壁碳纳米管的电学性质. 从这个角度上说, 径向压缩变形的且最外层半导体性质的多壁碳纳米管可能会具有半导体性质, 从而可以代

替容易聚拢成束的单壁碳纳米管来搭建场效应晶体管.

为了避免碳纳米管在晶体管中不确定性因素影响, 图 13 所示的是单壁开口、单壁闭口和三壁开口碳纳米管分别与钯电极单独接触时的界面接触构型. 结果表明, 如图 13(a) 所示, 单壁开口半导体碳纳米管在钯表面发生径向压缩变形, 形成带状结构, 范德瓦耳斯能差值约为 4.2 Mcal/mol (图 13(d)). 单壁闭口的碳纳米管的范德瓦耳斯能差值较小 (图 13(e)), 碳纳米管保持如图 13(b) 所示刚性状态, 没有几何形状变化, 但是底部与钯表面接触部分形成平面. 如图 13(c) 和图 13(f) 所示, 当三壁碳纳米管与钯电极表面接触时, 范德瓦耳斯能差值约为 3.4 Mcal/mol. 在这种情况下, 三壁的碳纳米管形成六层石墨烯的纳米带结构, 最下面两层石墨烯与径向压缩的单壁碳纳米管的带状结构



相似, 并且任意两层管壁的层间距几乎相等.

## 4 结 论

本文利用分子动力学方法研究了多壁碳纳米管与不同金属表面的界面接触行为. 结果表明, 多壁碳纳米管粘着在金属表面上达到稳定状态时范德瓦耳斯能下降到最小值, 减少的范德瓦耳斯能部分转化成内能, 导致碳纳米管的形状和位置变化. 两端开口的多壁碳纳米管与金属表面水平接触时的接触强度受初始间距、金属种类和接触长度影响, 并且水平接触模式下的接触强度比垂直接触模式的大. 两端开口的碳纳米管逐渐接近金属表面并最终在径向压缩变形而形成纳米带状结构, 而两端封闭的多壁碳纳米管只发生明显的轴向压缩. 在碳纳米管场效应晶体管中, 多壁碳纳米管像单壁碳纳米管一样发生径向压缩变形而形成带状结构, 并且各个管壁之间以及最外层管壁与金属电极之间的间距几乎相等.

感谢上海大学高性能计算中心提供的计算资源和技术支持以及感谢电子科技大学(深圳)高等研究院的张东星博士在论文撰写修改时提供的意见和建议.

## 参考文献

- [1] Yu M F, Dyer M J, Skidmore G D, Rohrs H W, Lu X, Ausman K D, Ehr J R V, Ruoff R S 1999 *Nanotechnology* **10** 244
- [2] Yu M F, Lourie O, Dyer M J, Moloni K, Kelly T F, S. R. R 2000 *Science* **287** 637
- [3] Ding H Y, Shi C Y, Li M, Zhan Y, Wang M Y, Wang Y Q, Tao C, Sun L N, Fukuda T 2018 *Sensors* **18** 1137
- [4] Wang Y Z, Ma L, Yang Q, Geng S C, Lin Y N, Chen T, Sun L N 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 068801 (in Chinese) [王亚洲, 马立, 杨权, 耿松超, 林旖旎, 陈涛, 孙立宁 2020 物理学报 **69** 068801]
- [5] Zhang Z Y, Wang S, Ding L, Liang X L, Xu H L, Shen J, Chen Q, Cui R L, Li Y, Peng L M 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 133117
- [6] Xie S, Jiao N, Tung S, Liu L 2015 *Micromachines* **6** 1317
- [7] Yu N, Shi Q, Nakajima M, Wang H P, Yang Z, Sun L N, Huang Q, Fukuda T 2017 *J. Micromech. Microeng.* **27** 105007
- [8] Fukuda T, Arai F, Dong L 2003 *Proc. IEEE* **91** 1803
- [9] Yang Z, Chen T, Wang Y Q, Sun L N, Fukuda T 2016 *Micro-Nano Lett.* **11** 645
- [10] Yang Q, Ma L, Yang B, Ding H Y, Chen T, Yang Z, Sun L N, Toshio F 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 136801 (in Chinese) [杨权, 马立, 杨斌, 丁汇洋, 陈涛, 杨湛, 孙立宁, 福田敏男 2018 物理学报 **67** 136801]
- [11] Liu P, Nakajima M, Yang Z, Fukuda T, Arai F 2009 *Proc. IMechE Part N: J. Nanoengineering and Nanosystems* **222** 33
- [12] Yu N, Nakajima M, Shi Q, Yang Z, Wang H P, Sun L N, Huang Q, Fukuda T 2017 *Scanning* **2017** 5910734
- [13] Shi Q, Yang Z, Guo Y N, Wang H P, Sun L N, Huang Q, Fukuda T 2017 *IEEE/ASME Trans. Mechatron.* **22** 845
- [14] Chen Q, Wang S, Peng L M 2006 *Nanotechnology* **17** 1087
- [15] Martel R, Schmidt T, Shea H R, Hertel T, Avouris P 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 2447
- [16] Cui J L, Zhang J W, He X Q, Mei X S, Wang W J, Yang X J, Xie H, Yang L J, Wang Y 2017 *J. Nanopart. Res.* **19** 110
- [17] Gao G H, Çagin T, Goddard W A 1998 *Nanotechnology* **9** 184
- [18] Yu M F, Dyer M J, Ruoff R S 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 4554
- [19] Liu B, Yu M F, Huang Y G 2004 *Phys. Rev. B* **70** 2806
- [20] Xiao J, Liu B, Huang Y, Zuo J, Hwang K C, Yu M F 2007 *Nanotechnology* **18** 395703
- [21] Xiao S G, Liu S L, Song M M, Ang N, Zhang H L 2020 *Multibody Sys. Dyn.* **48** 451
- [22] Xiao S G, Liu S L, Wang H Z, Lin Y, Song M M, Zhang H L 2020 *Nonlinear Dyn.* **100** 1203
- [23] Zhang D H, Liu Z K, Yang H B, Liu A M 2018 *Mol. Simul.* **44** 648
- [24] Zhang D H, Yang H B, Liu Z K, Liu A M 2018 *J. Alloys Compd.* **765** 140
- [25] Andriotis A, Menon M, Gibson H 2008 *IEEE Sens. J.* **8** 910
- [26] Cui J L, Zhang J W, Wang X W, Theogene B, Wang W J, Tohmoyoh H, He X Q, Mei X S 2019 *J. Phys. Chem. C* **123** 19693
- [27] Cui J L, Ren X Y, Mei H H, Wang X W, Zhang J W, Fan Z J, Wang W J, Tohmoyoh H, Mei X S 2020 *Appl. Surf. Sci.* **512** 145696
- [28] Xie J, Xue Q, Yan K, Chen H, Xia D, Dong M 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 14747
- [29] Yan K Y, Xue Q Z, Xia D, Chen H J, Xie J, Dong M D 2009 *ACS Nano* **3** 2235
- [30] Yan K Y, Xue Q Z, Zheng Q B, Xia D, Xie J 2009 *J. Phys. Chem. C* **113** 3120
- [31] Ling C C, Xue Q Z, Jing N N, Xia D 2012 *RSC Adv.* **2** 7549
- [32] Mozos J, Ordejón P, Brandbyge M, Taylor J, Stokbro K 2003 *Advances in Quantum Chemistry* (Salt Lake City: Academic Press) pp299–314
- [33] Chen W, Li H, He Y Z 2014 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16** 7907
- [34] Li R, Mi J X 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 046101 (in Chinese) [李瑞, 密俊霞 2017 物理学报 **66** 046101]
- [35] Akita S, Nishijima H, Nakayama Y 2000 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33** 2673
- [36] Yang Q 2020 *Micro-Nano Lett.* **15** 883
- [37] Maiti A, Ricca A 2004 *Chem. Phys. Lett.* **395** 7
- [38] Frank S P, Poncharal P, Wang Z L, Heer W A D 1998 *Science* **280** 1744
- [39] Xiang L, Wang Y W, Zhang P P, Fong X Y, Wei X L, Hu Y F 2018 *Nanoscale* **10** 21857
- [40] Xiao M M, Lin Y X, Xu L, Deng B, Peng H L, Peng L M, Zhang Z Y 2020 *Adv. Electron. Mater.* **6** 2000258
- [41] Zhang Z Y, Liang X L, Wang S, Yao K, Hu Y F, Zhu Y Z, Chen Q, Zhou W W, Li Y, Yao Y G, Zhang J, Peng L M 2007 *Nano Lett.* **7** 3603
- [42] Park C J, Kim Y H, Chang K J 1999 *Phys. Rev. B* **60** 10656
- [43] Lu J Q, Wu J, Duan W H, Liu F, Zhu B F, Gu B L 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 156601
- [44] Lu J Q, Wu J, Duan W H, Gu B L, Johnson H T 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 56
- [45] Giusca C E, Tison Y, Silva S R P 2008 *Nano Lett.* **8** 3350

# Molecular dynamics simulation of contact behaviors between multiwall carbon nanotube and metal surface<sup>\*</sup>

Yang Quan<sup>1)</sup>   Ma Li<sup>1)†</sup>   Geng Song-Chao<sup>1)</sup>   Lin Yi-Ni<sup>1)</sup>

Chen Tao<sup>2)‡</sup>   Sun Li-Ning<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> (*School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200072, China*)

<sup>2)</sup> (*Robotics and Microsystems Center, Soochow University, Suzhou 215021, China*)

( Received 23 December 2020; revised manuscript received 10 March 2021 )

## Abstract

The interfacial contact configuration and contact intensity between carbon nanotube and metal surface play an important role in the electrical performance of carbon nanotube field effect transistors and nanoscale carbon nanotube robotic manipulation. In this paper, we investigate numerically the contact configuration and the contact intensity between multiwall carbon nanotube with open ends or capped ends and various metal surfaces in carbon nanotube field effect transistor assembly by the molecular dynamics simulation. The simulation results show that the change in the position and shape of multiwall carbon nanotube on the metal surface are mainly due to the decrease of van der Waals energy reduction: the decrement of van der Waals energy is converted into the internal energy and kinetic energy of carbon nanotubes. Moreover, the binding energy between multiwall carbon nanotube and metal surface is negative, which indicates that multiwall carbon nanotube adheres to the metal surface. In addition, the contact intensity of multiwall carbon nanotube in horizontally contacting metal surface is influenced by initial distance, contact length and metal materials. The final equilibrium distance is around ~0.3 nm when the initial distance is less than ~1 nm. And the contact intensity increases with the augment of contact length between carbon nanotube and metal. The contact intensity between platinum and carbon nanotube is larger than that between tungsten and aluminum, therefore, platinum-coated probe is generally utilized for picking carbon nanotube up. The contact intensity of the carbon nanotubes with the open ends and closed ends in the vertical contact with the metal surface are both lower than those in the horizontal contact. The interfacial contact configuration of carbon nanotube and metal materials mainly include the displacement and geometric deformation of carbon nanotube. The displacement and geometric deformation of multiwall carbon nanotube with open ends on the metal surface finally result in its radial nanoscale ribbon structure. But the closed-end three-wall carbon nanotube has the small axial geometric deformation through comparing the concentration profiles between the initial carbon nanotube and the collapsed carbon nanotube. In a carbon nanotube field effect transistor, the collapsed multiwall carbon nanotube forms the ribbon structure like a single wall carbon nanotube. And the distance between carbon nanotube walls and between the outermost carbon nanotube wall and the metal electrode are both about ~0.34 nm. The atomic scale spacing ensures that electrons tunnel from the metal to the outermost carbon nanotube wall and migrate radially between the inner carbon nanotube walls.

**Keywords:** carbon nanotube, van der Waals energy, molecular dynamic

**PACS:** 61.48.De, 34.20.-b, 02.70.Ns

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202194

<sup>\*</sup> Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2018YFB1309200) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61573238).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [malian@shu.edu.cn](mailto:malian@shu.edu.cn)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [chent@suda.edu.cn](mailto:chent@suda.edu.cn)